



TITLE:

遷移金属錯体の分子シミュレーション

AUTHOR(S):

北川, 宏

CITATION:

北川, 宏. 遷移金属錯体の分子シミュレーション. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2016, 2015: 35-35

ISSUE DATE:

2016-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/214381>

RIGHT:

遷移金属錯体の分子シミュレーション

Molecular Simulation on Transition-Metal Complexes

京都大学大学院理学研究科 化学専攻 固体物性化学研究室

北川 宏

研究成果概要

プロトン移動は燃料電池の電極反応、触媒による二酸化炭素還元反応、光合成など、水、酸素、二酸化炭素が関与する酸化還元反応において鍵となる役割を果たしている。プロトン伝導体は燃料電池やセンサーに広く利用されており、特に燃料電池の能力を大きく左右する枢要部材であるため、活発に研究されている。当研究室では、新たなプロトン伝導体として、遷移金属錯体が連続した格子や鎖状構造を形成した多孔性配位高分子(PCP)に着目し、合成と物性評価を進めてきた。PCP は規則的に配置された細孔を有し、細孔の形状・サイズを制御可能であるため、ガス分離・吸蔵、高選択性触媒などへの応用が期待されている。Zr とテレフタル酸からなる PCP である UiO-66 に SO_3H を導入することによって、湿度 40% で $10^{-3} \text{ S cm}^{-1}$ の高いプロトン伝導度を達成できた。しかしながら、湿度を 95% まで上げてプロトン伝導度は $5.62 \times 10^{-3} \text{ S cm}^{-1}$ にとどまった。この原因を調べるため、PCP 中でのプロトンの解離エネルギーを計算した。結晶構造解析から、合成した UiO-66 はテレフタル酸と Zr を架橋する酸素が欠損した構造であることが判明していたが、酸素欠損に隣接する架橋酸素が強い塩基性を示すことが計算から示唆された。すなわち、プロトン伝導度を更に向上させるためには、欠陥を減少させる必要があるという設計指針が得られた。

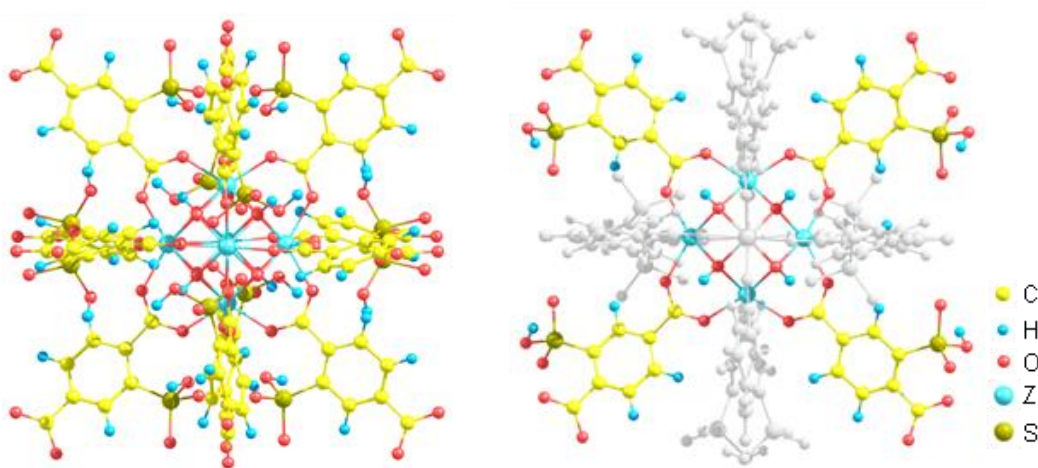


図 1: 欠陥を含まない UiO-66 のモデル(左)とテレフタル酸と酸素が欠損したモデル。

発表論文(謝辞あり)

1. J. M. Taylor *et al.*, J. Am. Chem. Soc. **137** (2015) 11498-11506.
2. T. Komatsu *et al.*, Inorg. Chem. **55** (2015) 546-548.